

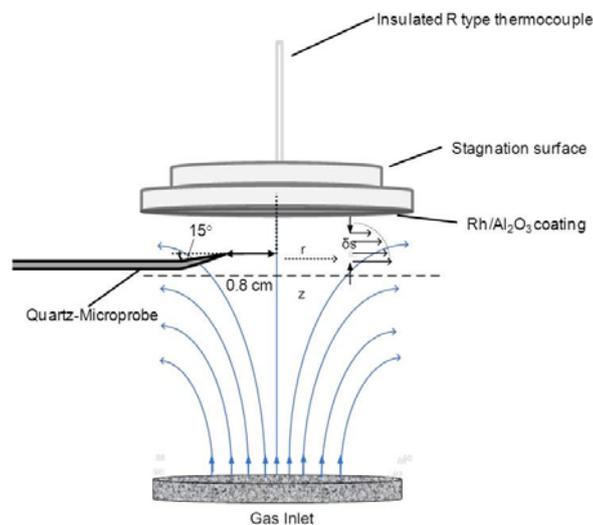


## Thema:

Katalytische Partialoxidation von niederen Kohlenwasserstoffen in einer Staupunktströmung

## Beschreibung:

Der Mechanismus der katalytischen Partialoxidation von Kohlenwasserstoffen ist bisher noch nicht vollständig verstanden. Einen wesentlichen Beitrag zur Entwicklung und Verbesserung dieser Reaktionsmechanismen leisten Versuche, die in einer Staupunktströmung [1] durchgeführt wurden, wie zum Beispiel das Bestimmen der Konzentrationsprofile für bestimmte Modellreaktionen in Abhängigkeit des Abstandes zur katalytischen Oberfläche [2], sowie Experimente zur katalytischen Zündung einer Reaktion [3].



**Abbildung 1: Schema der Staupunktströmung im Reaktor mitsamt einer eigens hergestellten Staupunkt-oberfläche, welche mit katalytisch aktivem Material beschichtet wird.**

In einer Staupunktströmung (Vgl. Abbildung 1) werden die Reaktionsgase senkrecht zu einer selbst-hergestellten katalytisch aktiven Oberfläche (Rh/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) mit hoher Strömungsgeschwindigkeit geleitet, auf welcher sie auftreffen und reagieren. Die Oberfläche wird beheizt und die Temperatur direkt an der katalytischen Beschichtung gemessen. Die Analyse der Reaktionsgase erfolgt mit einem Fourier-Transformierten Infrarotspektroskop (FTIR), sowie von zwei verschiedenen Sektorfeldmassenspektrometern (H-Sense, Air-Sense). Die Reaktionsgase werden aus der Reaktorkammer über eine Quarzmikrosonde abgezogen, welche relativ zur Oberfläche in axialer Rich-

tung bewegt werden kann. Die Besonderheit des Strömungsfeldes ist, dass es lediglich eine Dimension zur mathematischen Beschreibung beinhaltet, den Abstand zur Oberfläche. Demnach ist die Dichte, Druck, Konzentration und Temperatur nur abhängig vom Abstand  $z$  zur Oberfläche. Dies vereinfacht die Simulation des Strömungsfeldes erheblich, was sich deutlich in der Rechenzeit bemerkbar macht. Somit ist neben der experimentellen Bestimmung dieses Profils mit diesem Reaktor auch eine zeitsparende und einfache Simulation des Konzentrationsprofils mit verschiedenen Computerprogrammen möglich.

Im Rahmen einer Bachelorarbeit, eines Vertiefungspraktikums oder einer Masterarbeit kann eigenständig ein Messplan zur experimentellen Untersuchung des komplexen Reaktionsnetzwerks der katalytischen Partialoxidation und deren Nebenreaktionen anhand einer Modellteilreaktion erstellt und ausgeführt werden. Zudem werden mittels eines in der Gruppe von Herrn Prof. Deutschmann entwickelten Programmcodes (DETCHEM<sup>STAG</sup>) die Ergebnisse mit bestehenden Reaktionsmechanismen simuliert, mit dem Ziel, diese weiterzuentwickeln.

[1] R. J. Kee, M. E. Coltrin and P. Glarborg, *Chemically Reacting Flow*, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, **2003**.

[2] C. Karakaya and O. Deutschmann, *Chemical Engineering Science* **2013**, *89*, 171-184.

[3] J. N. Bär, C. Karakaya and O. Deutschmann, *Proceedings of the Combustion Institute* **2013**, *34*, 2313-2320.

### **Voraussetzungen:**

Interesse an aufwendigen experimentellen Arbeiten.

### **Betreuer:**

Dipl.-Chem. Julian Nicolaas Bär

### **Möglicher Beginn:**

Jederzeit nach Absprache